



TITLE:

1. プロファイル・アナリシス法による強誘電体の構造解析:  
BaTiO<sub>3</sub>と  
PbZr<sub><0.9></sub>Ti<sub><0.1></sub>O<sub>3</sub>(北海道大学理学部物理学教室,修士論文アブストラクト(1981年度))

AUTHOR(S):

伊藤, 弘

---

CITATION:

伊藤, 弘. 1. プロファイル・アナリシス法による強誘電体の構造解析: BaTiO<sub>3</sub>と PbZr<sub><0.9></sub>Ti<sub><0.1></sub>O<sub>3</sub>(北海道大学理学部物理学教室,修士論文アブストラクト(1981年度)). 物性研究 1982, 38(2): 53-54

ISSUE DATE:

1982-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/90653>

RIGHT:

## 修士論文アブストラクト (1981年度)

### ○北海道大学理学部物理学教室

- |   |         |
|---|---------|
| 1. プロファイルアナリシス法による強誘電体の構造解析<br>— $\text{BaTiO}_3$ と $\text{PbZr}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{O}_3$ —                | 伊 藤 弘   |
| 2. $\text{Nb}_{1-x}\text{M}_x\text{Se}_3$ ( $\text{M} = \text{Ta}, \text{Ti}$ ) における超伝導                           | 川 端 和 重 |
| 3. $\beta\text{-Na}_x\text{V}_2\text{O}_5$ の比熱と帯磁率  | 高 野 英 明 |
| 4. $3d$ 遷移金属の磁性と体積弾性率   | 高 橋 雅 幸 |
| 5. 絶縁体スピングラス $\text{Rb}_2\text{Nn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Cl}_4$ の磁性   | 榆 孝     |
| 6. ブリルアン散乱による $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ の研究  | 山 中 明 生 |
| 7. 混晶系 $(\text{NH}_4)_{2(1-x)}\text{R}_{2x}\text{SO}_4$ ( $\text{R} = \text{Rb}, \text{Cs}$ ) の<br>室温におけるX線結晶構造解析 | 吉 田 正 子 |

### 1. プロファイル・アナリシス法による強誘電体の構造解析 — $\text{BaTiO}_3$ と $\text{PbZr}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{O}_3$ —

伊 藤 弘

#### § 1. はじめに

強誘電体の物性に関する研究は広く行なわれているが、その物理的性質の理解の基礎となる結晶内の構成原子や、イオンの動きについての詳しい研究はあまり行なわれていない。

#### § 2. $\text{BaTiO}_3$

代表的な強誘電体であるチタン酸バリウム ( $\text{BaTiO}_3$ ) についてもそれは例外ではなく、特に低温相の精密な構造解析は、ほとんど行なわれておらず、 $0^\circ\text{K}$  に近づくと、どのような原子間距離に落ちつくかもわかっていない。その理由としては、低温での高精度実験のやりにくさ、双晶構造の存在、それに、Evans らによって報告された、X線構造解析の場合の原子パラメーターの相関などが障害となるためである。我々は、これらの困難さを解決するため、X線回折と中性子線回折を併用し、各測定法の長所を生かす方法を取り、プロファイルアナリシス法を用いて、熱攪乱の少なくなった状態の  $4.2\text{K}$  で構造解析を行なった。また、比較のため、 $77\text{K}$  でも解析を行なった。その結果によると、格子の歪みは数十K以下では殆んど変化が止

まり、温度降下に伴い、酸素原子が Ti 原子の方へ、やや近づいて来る傾向が認められた。図 1 には  $\text{BaTiO}_3$  の格子定数の温度依存性、図 2 には 77K と 4.2K の Ti-O 8 面体の歪みを示してある。

### § 3. $\text{PbZr}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{O}_3$

$\text{PbTiO}_3$  と  $\text{PbZrO}_3$  の混晶系のうちの菱面体相は、2つの相から成るが、低温相（室温）の持つ超格子構造は酸素原子の動きと関係しているため、長い間 X 線回折では両者の構造的な差はわからなかった。1969 年に中性子線回折法で、低温相の超格子構造が見出されたが、現在までに 2つの異なるモデルが報告されており、パラメーターの相関の問題も残されていた。我々はこの物質に対しても、X 線回折と中性子線回折を併用したプロフィールアナリシス法を適用した。その結果、酸素 8 面体の動きに関しては、Glazer らの結果を支持する値が得られ、パラメーターの相関はかなり減少し、構造の精度を向上させる事ができた。

### § 4. まとめ

以上のように、 $\text{BaTiO}_3$ （低温相）と  $\text{PbZr}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{O}_3$ （室温相）の構造を解明、精密化する事ができた。また、その過程を通じて、X 線回折と中性子線回折を併用したプロフィールアナリシス法の有効性を確かめる事ができた。

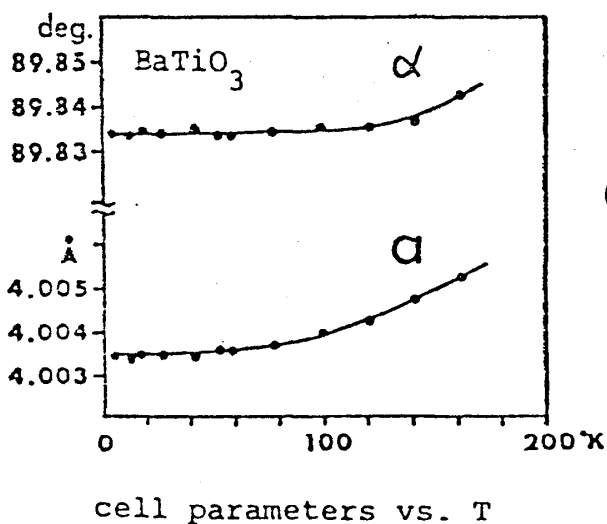


図 1

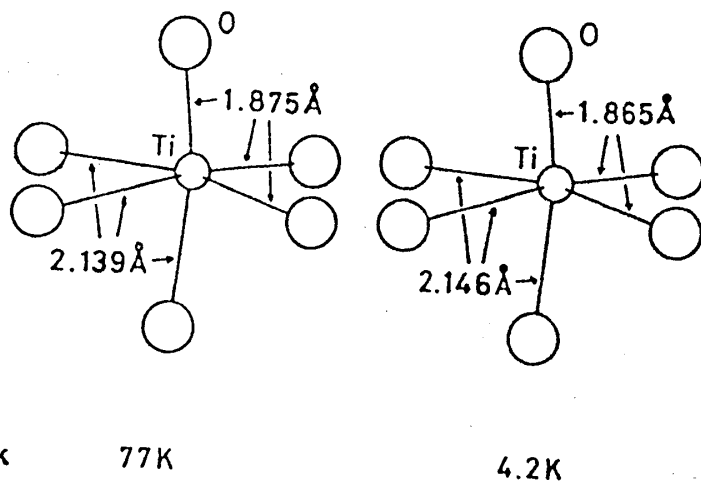


図 2